

OPTIMIZAÇÃO DE UM SISTEMA DE LAMAS ACTIVADAS POR UM ALGORÍTMO GENÉTICO

ISABEL A. C. P. ESPÍRITO SANTO(1); LINO COSTA(1); ROMAN DENYSIUK(2);
EDITE M. G. P. FERNANDES(1)

RESUMO: Apresenta-se, neste artigo, um problema de optimização relacionado com um processo biológico de tratamento de águas residuais. A formulação matemática que surge da modelação de um sistema de lamas activadas de uma ETAR é optimizado, em termos de custos de investimento e custos operacionais, através de um algoritmo genético. É usado o modelo ASM1 para as lamas activadas, um dos modelos matemáticos mais difundidos e aceites pela comunidade científica. Para o sedimentador secundário é usado um modelo que combina as normas ATV e o modelo da dupla exponencial. Trata-se de uma formulação matemática de elevada complexidade. O modelo está disponível em MatLab e AMPL, e foi resolvido por uma heurística que garante convergência para um óptimo global do problema. Esta heurística baseia-se num algoritmo genético que implementa elitismo.

PALAVRAS CHAVE: ALGORITMOS GENÉTICOS, CUSTO MÍNIMO, LAMAS ACTIVADAS, MODELAÇÃO

(1) Departamento de Produção e Sistemas, Universidade do Minho
{iapinho,lac,emgpf}@dps.uminho.pt
Campus de Gualtar, 4710-057 Braga, Portugal
(2) Centro Algoritmi, Universidade do Minho
denysiukr@gmail.com
Campus de Gualtar; 4710-057 Braga, Portugal

1 INTRODUÇÃO

Após a consciencialização gradual e generalizada a respeito das agressões ambientais, em particular aos recursos hídricos, a qual teve tradução na legislação ambiental e na emergência de uma cidadania ecológica e com a posterior actuação governamental/autárquica no sentido de implementar Estações de Tratamento de Águas Residuais (ETAR), importa agora melhorar o seu desempenho.

Para o tipo de efluente em causa, deve calcular-se a combinação que leva a um desenho óptimo (mais eficiente / menos dispendioso), recorrendo a modelos matemáticos que descrevam a evolução no sistema das características físicas, químicas e biológicas da água a tratar. Isto porque os elevados custos, quer de construção, quer de operação associados ao tratamento das águas podem ameaçar a sobrevivência de algumas indústrias menos preparadas.

Neste trabalho, a formulação matemática que surge da modelação de um sistema de lamas activadas de uma ETAR é optimizada, em termos de custos de investimento e custos operacionais, através de um algoritmo genético (Costa e Oliveira, 2001). Para efeitos de comparação, o problema é também resolvido pelo *solver* comercial LOQO (Vanderbei e Shanno, 1999)

Um dos modelos matemáticos mais difundidos e aceites pela comunidade científica é o ASM1 (Henze *et al.*, 1986), que contempla, para além da remoção da matéria carbonácea, os processos de remoção de azoto – nitrificação e desnitrificação. Para o sedimentador secundário é usado um modelo que combina as normas ATV (Ekama *et al.*, 1978) e o modelo da dupla exponencial proposto por Takács *et al.* (1991). Este modelo já foi utilizado no passado, com bons resultados (Espírito Santo *et al.*, 2006). No entanto, trata-se de uma formulação matemática de elevada complexidade. Além disso, grande parte dos *solvers* disponíveis, como o LOQO, baseiam-se numa procura local, o que significa que o óptimo encontrado pode não ser o melhor.

O modelo está disponível em MatLab e AMPL, e foi resolvido por uma heurística que garante convergência para um óptimo global do problema. Esta heurística baseia-se num algoritmo genético que implementa elitismo.

Este artigo organiza-se em cinco secções, como a seguir se descreve. Na Secção 2 faz-se uma apresentação detalhada do modelo de lamas activadas, bem como uma descrição pormenorizada da formulação do problema de optimização, apresentando-se as restrições e a formulação da função objectivo. Na Secção 3 é apresentado o algoritmo genético usado para calcular o óptimo global do sistema de lamas activadas. Por fim, nas secções 4 e 5

apresentam-se os resultados numéricos resultantes das experiências computacionais, e as conclusões e trabalho futuro.

2 O SISTEMA DE LAMAS ACTIVADAS

O sistema de lamas activadas é constituído por um arejador e um sedimentador (Figura 1), sendo o mais utilizado para o tratamento secundário de águas residuais. Como tal, surgiu a necessidade de ser modelado, uma vez que se consegue deste modo reduzir um sistema complexo a uma imagem conceptual de como ele funciona. Hoje em dia, a modelação de tais sistemas tornou-se uma parte essencial do desenho e operação de ETAR. Existem actualmente modelos internacionalmente aceites pela comunidade científica. A vantagem de se utilizarem modelos deste tipo reside no facto de todos os modeladores poderem usar uma linguagem universal, quer em termos de conceitos, quer em termos de nomenclatura.

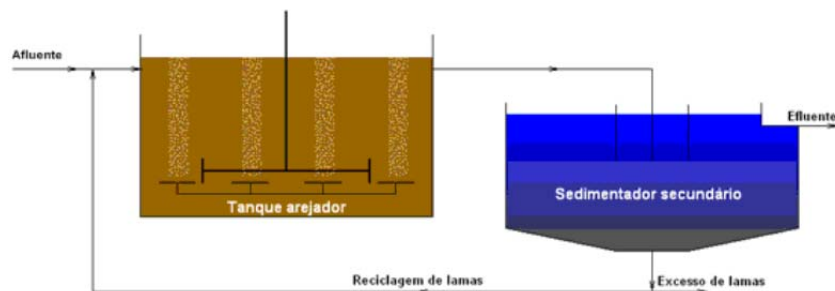


Figura 1. Representação esquemática de um sistema de lamas activadas (adaptado do simulador GPS-X (GPS-X Technical Reference (2002). Hydromantis, Inc.))

2.1 Tanque arejador

O principal objectivo do tanque arejador é remover a matéria orgânica carbonácea e os compostos de azoto. Os modelos mais divulgados são os do tipo ASM que, por utilizarem uma notação matricial, tornam-se muito simples de interpretar. Foram descritos por Henze *et al.* (1986), e contemplam, além da remoção da matéria carbonácea, os processos de remoção de azoto – nitrificação e desnitrificação, originando bons resultados em simulações. Em particular, o modelo ASM1 pode ser utilizado para todos os tipos de reactores, e de arejamento, considerando-se neste trabalho um reactor perfeitamente agitado (RPA) em estado estacionário.

Dentro de um sistema, a concentração de um componente pode ser afectada por vários processos diferentes. Para ser possível de uma forma expedita identificar e verificar o que se passa com cada um desses componentes, surgiu a representação em matriz de Peterson. Este tipo de representação permite ainda a obtenção dos balanços mássicos de uma forma quase imediata.

A equação genérica, em termos matemáticos, para um balanço mássico num RPA traduz-se por

$$\frac{Q}{V_a} = (\xi_{\text{entrada}} - \xi) + r_\xi = \frac{d\xi}{dt}, \quad (1)$$

onde Q é o caudal a ser tratado, V_a o volume do tanque arejador, ξ e ξ_{entrada} são as concentrações do componente ao qual se está a fazer o balanço mássico no reactor à saída e à entrada, respectivamente. O termo de reacção do sistema, r_ξ , é obtido através do somatório do produto dos coeficientes estequiométricos, $v_{\xi j}$, que se encontram ao longo das colunas da matriz de Peterson referente ao modelo ASM1 (Henze *et al.*, 1986), com a expressão da taxa do processo, ρ_j , para o componente considerado no balanço mássico:

$$r_\xi = \sum_j v_{\xi j} \rho_j. \quad (2)$$

Em estado estacionário o termo de acumulação, dado por $d\xi/dt$, é nulo, uma vez que se considera que a concentração do componente não varia ao longo do tempo. É razoável considerar-se estado estacionário quando um reactor está em operação durante um período suficientemente longo, sem haver grandes variações nas condições de operação, e neste caso pretende-se fazer um estudo a longo prazo – a optimização do projecto da ETAR.

O modelo ASM1 envolve 8 processos que incorporam 13 componentes diferentes, tais como o substrato, bactérias, oxigénio dissolvido, entre outros. Para mais detalhes consultar Espírito Santo (2007).

2.2 Sedimentador secundário

Apesar de tradicionalmente se dar mais importância ao tanque arejador nos sistemas de lamas activadas, o sedimentador secundário desempenha também um papel crucial no tratamento de efluentes. Depois do efluente abandonar o tanque arejador, onde sofreu o tratamento biológico, é necessário separar a água tratada das lamas biológicas. A forma mais comum de se efectuar esta separação é através de sedimentação em tanques. A optimização da área de sedimentação e profundidade do sedimentador deve basear-se nas

características das lamas, que estão directamente relacionadas com o desempenho do tanque arejador. Assim, a operação do reactor biológico influencia directamente o desempenho do sedimentador secundário e, por esta razão, nunca devem ser considerados separadamente.

As normas ATV consistem num modelo definido por equações empíricas mas que funciona muito bem no desenho de tanques sedimentadores. O sedimentador é dividido em quatro camadas (Figura 2). A inferior, h_4 , contém as lamas espessadas que são extraídas:

$$h_4 = X_P \frac{DVSI}{1000} \quad (3)$$

onde $DVSI$ representa o índice volumétrico das lamas diluídas e X_P a concentração de lamas no afluente à decantação secundária num evento de pico. Acima desta ocorre o armazenamento de lamas, sendo esta, h_3 , a zona que permite que o sedimentador suporte as condições adversas durante eventos de pico, mantendo uma concentração de lamas adequada

$$h_3 = \Delta X V_a \frac{DVSI}{480 A_s} \quad (4)$$

em que ΔX representa a variação da concentração de lamas dentro do tanque arejador durante um evento de pico e A_s é a área do sedimentador.

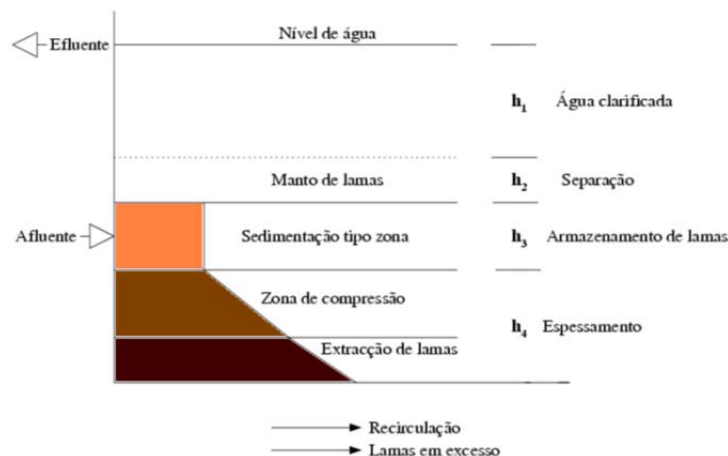


Figura 2. Perfil típico de concentração de sólidos - profundidade, adoptado pelas normas ATV (adaptado de Ekama *et al.* (1978))

A seguir vem uma zona de transição, onde ocorre a separação entre as lamas e o efluente tratado - h_2 - e, finalmente, na camada superior - h_1 - é onde se encontra o efluente tratado que é extraído do sistema de lamas activadas. As alturas h_1 e h_2 são estabelecidas empiricamente, considerando-se 1m a soma das duas. A altura do sedimentador - h - é o resultado da soma destas quatro camadas. Pode haver assim uma troca entre altura e área

da forma que for mais conveniente para o sistema em causa, quer em termos de custos, quer em termos de tipo de construção – sedimentador mais largo *versus* sedimentador mais alto. Para que haja controlo do efluente em situações de pico, estabelece-se uma relação entre o caudal nesta situação e a área de sedimentação

$$\frac{Q_P}{A_s} \leq 2400(X_P D V S I)^{-1.34} \quad (5)$$

sendo Q_P o caudal de pico. Em termos de simulações, o modelo por excelência é o da dupla exponencial (Takács *et al.*, 1991). O modelo da dupla exponencial surge para dar resposta ao problema de existirem num tanque sedimentador zonas de concentrações de sólidos muito distintas. Há a zona do fundo do tanque onde a concentração de sólidos é muito elevada e ao mesmo tempo há o topo do tanque onde é retirado o efluente clarificado com uma concentração de sólidos muito baixa. Isto implica que não possam ser aplicados modelos de sedimentação dificultada ou discreta a todo o tanque.

Comparado com o modelo anterior, este está mais próximo da realidade já que se baseia em balanços mássicos no interior do próprio sedimentador, que é dividido em camadas. Estas são agrupadas de acordo com a sua posição relativa à camada onde é introduzido o efluente que vem do tanque arejador. A estrutura das equações resultantes, que tem duas exponenciais (de onde provém o nome do modelo), permite contemplar as situações com uma elevada concentração de sólidos (abaixo da alimentação), bem como com uma concentração de sólidos pequena (acima da alimentação). Impõe ainda a limitação de passagem de sólidos para uma camada inferior caso esta tenha atingido uma concentração limite (que depende do tipo de lamas) e estabelece que uma camada inferior não pode ter uma concentração de sólidos inferior à que se encontra imediatamente acima, para que o modelo seja consistente em termos físicos. Este tipo de limite origina equações não diferenciáveis. No entanto, ao usar-se este modelo num processo de optimização, não são previstos os eventos de pico. Por essa razão, o sedimentador obtido deste modo não é robusto.

Neste modelo assume-se um sedimentador unidimensional, o qual é dividido em dez camadas de igual espessura (Figura 3). São consideradas algumas simplificações: considera-se que não há reacções biológicas neste tanque, o que significa que a concentração de matéria dissolvida se mantém sempre constante ao longo de todas as camadas; é considerado apenas fluxo vertical; os sólidos são distribuídos uniformemente ao longo de toda a área transversal da camada de alimentação ($j = 7$).

A função de sedimentação descrita neste modelo é

$$v_{s,j} = \max \left(0, \min \left(v'_0, v_0 \left(e^{-r_h(SST_j - f_{ns}SST_a)} - e^{-r_p(SST_j - f_{ns}SST_a)} \right) \right) \right). \quad (6)$$

O primeiro termo exponencial caracteriza a velocidade de sedimentação para partículas grandes, enquanto o segundo é um factor de correcção da velocidade que tem em conta as partículas mais pequenas e lentas. $v_{s,j}$ é a velocidade de sedimentação na camada j , SST_j são os sólidos suspensos totais em cada uma das dez camadas do sedimentador e v_0 , v'_0 , r_h , r_p e f_{ns} são parâmetros de sedimentação (Takács *et al.* (1991)). SST_7 vai ser igual a SST_a , uma vez que a camada de alimentação é a sétima e vai ter precisamente a concentração de sólidos que vem do tanque arejador.

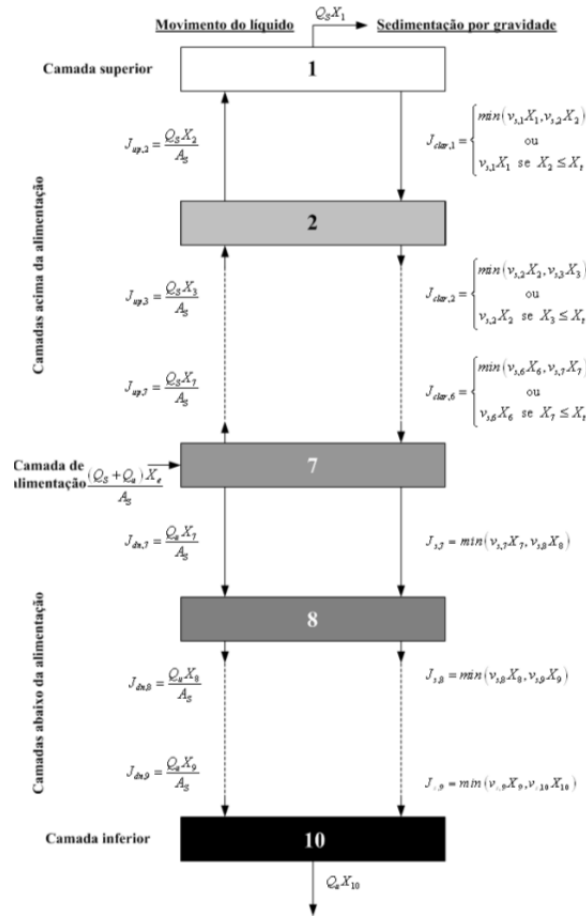


Figura 3. Balanços de sólidos em torno das camadas do sedimentador, de acordo com o modelo da dupla exponencial (adaptado de Takács *et al.* (1991))

O fluxo de sólidos devido aos movimentos no seio do líquido pode ser ascendente ou descendente, v_{up} e v_{dn} respectivamente, dependendo da posição relativa à camada de alimentação. Assim

$$v_{up} = \frac{Q_{ef}}{A_s} \quad \text{e} \quad v_{dn} = \frac{Q_r Q_w}{A_s} \quad (7)$$

em que os subscritosef, r e w dizem respeito respectivamente ao efluente tratado, às lamas recicladas e à purga de lamas. O fluxo de sedimentação, $J_{s,j}$, para a camada de alimentação e camadas abaixo da alimentação ($j = 7, \dots, 10$), é dado por

$$J_{s,j} = v_{s,j} SST_j \quad (8)$$

enquanto nas camadas acima da alimentação ($j = 1, \dots, 6$) o fluxo de clarificação, $J_{clar,j}$ é dado por

$$J_{clar,j} = \begin{cases} v_{s,j} SST_j & \text{se } SST_j \leq SST_t \\ \min(v_{s,j} SST_j, v_{s,j} SST_{j+1}) & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (9)$$

em que SST_t é a concentração limite que as lamas podem atingir.

Os balanços resultantes em torno de cada camada, considerando estado estacionário, são os que se seguem:

$$\frac{v_{up}(SST_{j+1} - SST_j) - J_{clar,j}}{h/10} = 0, \quad j = 1 \quad (10)$$

$$\frac{v_{up}(SST_{j+1} - SST_j) + J_{clar,j-1} - J_{clar,j}}{h/10} = 0, \quad j = 2, \dots, 6 \quad (11)$$

$$\frac{\frac{QSST_a}{A_s} + J_{clar,j-1} - (v_{up} + v_{dn})SST_j - \min(J_{s,j}, J_{s,j+1})}{h/10} = 0, \quad j = 7 \quad (12)$$

$$\frac{v_{dn}(SST_{j-1} - SST_j) + \min(J_{s,j}, J_{s,j-1}) - \min(J_{s,j}, J_{s,j+1})}{h/10} = 0, \quad j = 8, 9 \quad (13)$$

$$\frac{v_{dn}(SST_{j-1} - SST_j) + \min(J_{s,j-1}, J_{s,j})}{h/10} = 0, \quad j = 10 \quad (14)$$

O uso combinado dos dois modelos acima referidos para descrever o sedimentador secundário está preparado para eventos de pico sem ser necessário recorrer a um sobredimensionamento excessivo. Assim, ultrapassam-se as limitações e potenciam-se as vantagens de cada um dos modelos quando usados de forma isolada. Um estudo preliminar destes dois modelos centrado na simulação da sua robustez pode ser encontrado em Espírito Santo *et al.* (2006).

2.3 Balanços gerais

O comportamento do sistema, em termos de concentrações e caudais, pode ser descrito por balanços. De forma a atingir um sistema consistente, estes balanços devem ser feitos considerando todo o sistema de lamas activadas e não apenas cada um dos processos

unitários isoladamente. Estes foram feitos à matéria em suspensão, matéria dissolvida e caudais. As equações para os compostos em suspensão, genericamente representados por $X_?$ (orgânicos e inorgânicos) têm a forma seguinte:

$$(1 + r)Q_{\text{inf}}X_{?\text{ent}} = Q_{\text{inf}}X_{\text{inf}} + (1 + r)Q_{\text{inf}}X_? - \frac{V_a X}{SRT X_{?r}}(X_{?r} - X_{?\text{ef}}) - Q_{\text{inf}}X_{?\text{ef}}, \quad (15)$$

em que X representa a CQO (carência química de oxigénio) em suspensão, r é a taxa de reciclo, SRT é o tempo de retenção das lammas e $Q_?$ representa os caudais volumétricos. Em termos de subscritos, inf diz respeito ao afluente, ent à entrada do tanque arejador, r às lammas recicladas e ef ao efluente tratado.

Para os compostos solúveis ($S_?$) vem

$$(1 + r)Q_{\text{inf}}S_{?\text{ent}} = Q_{\text{inf}}S_{?\text{inf}} + rQ_{\text{inf}}S_?, \quad (16)$$

e para os caudais volumétricos, os balanços resultantes são

$$Q = Q_{\text{inf}} + Q_r \quad \text{e} \quad Q = Q_{\text{ef}} + Q_r + Q_w. \quad (17)$$

2.4 Variáveis compostas

A maioria das variáveis que aparecem no modelo ASM1 não é mensurável em sistemas reais. Por esta razão, são utilizadas variáveis compostas, que também definem um conjunto de restrições. Estas variáveis são a carência química de oxigénio (CQO), os sólidos suspensos voláteis (SSV), os sólidos suspensos totais (SST), a carência bioquímica de oxigénio (CBO), o azoto total de Kjeldahl (TKN) e o azoto total (N). Poder-se-ão encontrar mais detalhes a este respeito em Espírito Santo (2007).

2.5 Definições das variáveis do sistema

Devem ser adicionadas algumas definições de variáveis do sistema ao modelo de forma a definir correctamente o sistema. Estas definições incluem o SRT , r , HRT (tempo de retenção hidráulica), r_p (reciclo durante um evento de pico), Q_{r_p} (caudal volumétrico durante um evento de pico) e a velocidade máxima de *overflow* (Q_p/A_s). Estas equações podem ser encontradas de forma detalhada em Espírito Santo (2007).

2.6 Restrições operacionais

Todas as variáveis do modelo devem ser não negativas, mas em alguns casos são impostos limites mais restritivos devido a limitações operacionais. Estas condições definem um conjunto de restrições de limites simples nas variáveis.

2.7 Restrições de qualidade

As restrições de qualidade surgem da aplicação directa das leis ambientais e dizem respeito à CQO , N e SST . Deste modo, de acordo com a lei portuguesa estabelece-se $CQO_{ef} \leq 125$, $N_{ef} \leq 15$ e $SST_{ef} \leq 35$.

2.8 Função objectivo

A função objectivo representa o custo total e depende de custos de investimento e de operação. Considera-se, por uma questão de simplicidade, que todos os fluidos se movem por acção da gravidade, não sendo necessário incluir os custos relativos a bombas nesta função.

Os custos de operação encontram-se normalmente numa base anual, necessitando, por isso, de serem actualizados para um valor presente através da função Γ :

$$\Gamma = \sum_{j=1}^n \frac{1}{(1+i)^j} = \frac{1 - (1+i)^{-n}}{i}. \quad (18)$$

Usa-se, neste problema, $i = 0.05$ e $n = 20$ anos. O custo total (CT) resulta do somatório dos custos de investimento (CI) e de operação (CO):

$$CT = CI + \Gamma CO. \quad (19)$$

As funções custo que se podem encontrar na literatura, e que continuam a ser aceites, são do tipo $C = aZ^b$ (Tyteca, 1977), em que a e b são os parâmetros a estimar e Z é a característica do processo unitário que mais influencia o custo. Os parâmetros a e b são estimados usando a técnica dos mínimos quadrados e recorrendo a um conjunto de valores de Z e C . A função custo foi obtida através de dados reais recolhidos de uma empresa construtora de ETAR e é a seguinte:

$$CT = 174.2V_a^{1.07} + 12487G_s^{0.62} + 114.8G_s + 955.5A_s^{0.97} + 41.3(A_s h)^{1.07} \quad (20)$$

onde G_s representa o caudal de arejamento.

3 O ALGORITMO GENÉTICO

Os Algoritmos Genéticos (AGs) são um modelo computacional de procura probabilística, inspirados no processo de selecção natural e genética (Goldberg, 1989). Os componentes básicos dos AGs são a população de pontos, em que cada um deles representa uma potencial solução para o problema de optimização, o mecanismo de avaliação dos pontos da população e os operadores genéticos que geram novos pontos, possibilitando a pesquisa de novas soluções. Os AGs iniciam a procura a partir de uma população de pontos P de tamanho s . Apesar de, tradicionalmente, os AGs utilizarem representações binárias das soluções, nesta implementação utiliza-se uma representação real uma vez que se trata de um problema contínuo. Logo, cada ponto da população $z^{(l)}$, para $l = 1, \dots, s$, é um vector de dimensão n (número de variáveis do problema). Uma função de *fitness* é definida com o objectivo de comparar os pontos da população e aplicar uma selecção estocástica que garanta que os melhores pontos têm maior probabilidade de serem seleccionados. Foi implementado elitismo através da manutenção, ao longo da procura, de um determinado número e , dos melhores pontos na população (Costa e Oliveira, 2001). Aplicou-se a selecção por torneio onde são, sucessivamente, realizados torneios entre dois pontos e o melhor (com menor valor de *fitness*) é escolhido. Este processo é repetido tantas vezes quanto o número de pontos a seleccionar ($s - e$ pontos).

Novos pontos no espaço de procura são gerados pela aplicação de operadores genéticos (recombinação e mutação) aos pontos seleccionados a partir da população. A recombinação combina dois pontos de forma a gerar dois novos. Implementou-se o *Simulated Binary Crossover* (SBX) (Deb e Agrawal, 1995) que simula o princípio de funcionamento da recombinação com base em um ponto aplicado a representações binárias. Dois pontos, $z^{(1)}$ e $z^{(2)}$, são aleatoriamente escolhidos a partir dos pontos seleccionados e, com probabilidade p_c , dois novos pontos, $w^{(1)}$ e $w^{(2)}$ são gerados de acordo com

$$w_i^{(1)} = 0.5 \left((1 + \beta_i) z_i^{(1)} + (1 - \beta_i) z_i^{(2)} \right) \quad (21)$$

$$w_i^{(2)} = 0.5 \left((1 - \beta_i) z_i^{(1)} + (1 + \beta_i) z_i^{(2)} \right) \quad (22)$$

$$\beta_i = \begin{cases} (2r_i)^{\frac{1}{\eta_c + 1}}, & r_i \leq 0.5 \\ \left(\frac{1}{2(1 - r_i)} \right)^{\frac{1}{\eta_c + 1}}, & r_i > 0.5 \end{cases} \quad (23)$$

para $i = 1, \dots, n$, onde $r_i \sim U(0,1)$ e $\eta_c > 0$ é um parâmetro da distribuição. Este procedimento é repetido até que o número de pontos gerados seja igual ao número de pontos previamente seleccionados.

De seguida, é aplicada mutação polinomial, com probabilidade p_m , aos pontos gerados por recombinação. A mutação introduz diversidade na população dado que a recombinação usada em exclusivo, não poderia garantir a exploração de novas regiões do espaço de procura. Este operador garante que a probabilidade de criar um novo ponto $t^{(l)}$ perto do anterior $w^{(l)}$ ($l = 1, \dots, s$), é superior à probabilidade de gerar um afastado dele. A mutação pode ser expressa por

$$t_i^{(l)} = w_i^{(l)} + (u_i - l_i)l_i \quad (24)$$

$$l_i = \begin{cases} (2r_i)^{\frac{1}{\eta_m + 1}}, & r_i < 0.5 \\ \left(\frac{1}{2(1 - r_i)}\right)^{\frac{1}{\eta_m + 1}}, & r_i \geq 0.5 \end{cases} \quad (25)$$

para $i = 1, \dots, n$, onde $r_i \sim U(0,1)$ e $\eta_m > 0$ é um parâmetro da distribuição. l_i e u_i são, respectivamente, os limites inferior e superior nas variáveis.

O algoritmo termina ao fim de k_{\max} iterações, sendo devolvido o melhor ponto na população.

As restrições de limites simples são tratadas por uma técnica de projecção, i.e., cada novo ponto gerado é projectado, componente a componente, de forma a satisfazer os limites das restrições. As restrições de igualdade do problema da forma, $h_i(x) = 0$, foram convertidas em restrições de desigualdade, introduzindo uma pequena tolerância positiva $\epsilon > 0$ de tal forma que $h_i(x) - \epsilon \leq 0 \wedge -h_i(x) - \epsilon \leq 0$. Para tratar as restrições de desigualdade, utilizou-se o método de tratamento de restrições baseado numa função de penalidade, proposto por Deb (2000), que não requer nenhum parâmetro de penalidade. Esta abordagem só pode ser aplicada a métodos de procura baseados em populações como, por exemplo, os algoritmos genéticos. Portanto, o valor de *fitness* de uma solução não admissível depende não só das violações das restrições, mas também dos valores de *fitness* dos pontos na população. A função de *fitness* $F(x)$ para comparar soluções considera, para soluções não admissíveis, a sua violação das restrições que pode ser expressa por:

$$F(x) = \begin{cases} f(x), & g_j(x) \leq 0 \text{ para todo } j = 1, \dots, m \\ f_{\max} + \sum_{j=1}^m \max(0, g_j(x)), & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (26)$$

onde f_{\max} é o valor da função objectivo da pior solução admissível na população e $g_j(x)$, $j = 1, \dots, m$ são as restrições de desigualdade. Uma vantagem importante desta abordagem é que não requer o cálculo do valor da função objectivo de soluções não admissíveis, explorando o mecanismo de selecção de forma a garantir que:

- quando duas soluções admissíveis são comparadas, é escolhida a que tem um valor da função objectivo menor;
- quando uma solução é admissível e a outra não, a admissível é escolhida;
- quando duas soluções não admissíveis são comparadas, a que tiver menor violação das restrições é escolhida.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

O modelo matemático tem 71 parâmetros, 113 variáveis, 103 restrições de igualdade e uma restrição de desigualdade. Os parâmetros estéquiométricos, cinéticos e operacionais são os que aparecem no simulador GPS-X por defeito e são normalmente encontrados em ETAR reais baseadas em lamas activadas. O problema foi codificado em AMPL (Fourer *et al.*, 1990) e em MatLab. Os resultados numéricos foram obtidos com um Intel Core2 Duo CPU 1.8GHz com 2GB de memória e são os que se apresentam no Quadro 1. Usou-se o *solver* LOQO (Vanderbei e Shanno, 1999), que implementa um método primal-dual de pontos interiores, e o algoritmo genético (AG) descrito anteriormente (Costa e Oliveira, 2001). Relativamente ao LOQO, como critério de paragem foi usada uma não admissibilidade primal e dual inferior a 10^{-5} e 3 dígitos de concordância entre as soluções primal e dual. Todos os outros parâmetros usados foram os que se encontram por defeito no LOQO. O AG foi implementado em linguagem MatLab de acordo com o descrito na Secção 3. Todos os parâmetros foram mantidos constantes nas 10 execuções realizadas com os seguintes valores: $s = 200$, $e = 20$, $p_c = 0.9$, $\eta_c = 20$, $p_m = 1/n$, $\eta_m = 20$ e $k_{\max} = 2500$. Para aproximação inicial x_0 considerou-se os valores fornecidos pelo simulador GPS-X com dados reais do afluente.

O Quadro 1 mostra os resultados em termos do melhor valor (f_{melhor}), do valor médio ($f_{\text{médio}}$) e do pior valor (f_{pior}) da função objectivo obtidos nas 10 execuções, em milhões de euros, o desvio padrão dos valores da função objectivo ($f_{\text{desvio padrão}}$), para o AG. Apresenta ainda a solução obtida pelo LOQO.

Quadro 1. Resultados para o custo total obtidos pelo algoritmo genético e pelo LOQO.

<i>solver</i>	f_{melhor}	$f_{\text{médio}}$	f_{pior}	$f_{\text{desvio padrão}}$
AG	0.519	0.579	0.801	0.0835
LOQO	2.61	----	----	----

O Quadro 2 lista os valores óptimos das variáveis de decisão mais importantes da melhor solução obtida pelo AG, nomeadamente, o volume do tanque arejador, o caudal de arejamento, a área e profundidade do sedimentador secundário, bem como a *CQO*, *SST*, e *N* no efluente. Apresentam-se os mesmos valores obtidos pela solução do LOQO.

Quadro 2. Resultados obtidos para algumas variáveis pela melhor solução do algoritmo genético e pelo LOQO.

<i>solver</i>	V_a (m ³)	G_S (m ³ /dia PTN)	A_s (m ²)	h (m)	CQO (g/m ³)	SST (g/m ³)	N (g/m ³)
AG	942	100	27	1.0	88.8	5.8	14.4
LOQO	531	3408	108	4	58.2	6.2	6.8

5 CONCLUSÕES E TRABALHO FUTURO

A principal conclusão que se pode tirar deste estudo, é que a solução obtida pelo LOQO, um método de procura local que usa derivadas das funções envolvidas no problema, não corresponde ao óptimo global, levando a uma solução com um valor de custo total cerca de cinco vezes superior ao custo total obtido na melhor solução em 10 execuções realizadas pelo algoritmo genético. Tratando-se de um problema de elevada complexidade, fortemente não linear, com muitas restrições de igualdade, não convexo e com pontos de descontinuidade, era de esperar que um algoritmo de pesquisa local e que usa informação das derivadas do problema, não conduzisse a bons resultados. Acima de tudo, nunca há garantia que a solução obtida é a melhor, como se verificou neste caso.

Relativamente à qualidade do efluente, verificou-se que todas as restrições impostas pela lei são cumpridas. Mais ainda, os limites não são atingidos, o que confere alguma robustez ao desenho obtido. Todos os valores mostrados no Quadro 2 têm significado físico e são credíveis para um sistema de lamas activadas. Apesar do desenho obtido ser economicamente atractivo, será desenvolvido no futuro um modelo com uma abordagem multi-objectivo e considerando algumas variáveis inteiras/discretas. Esta abordagem permitirá um estudo mais abrangente uma vez que não será necessário utilizar funções-custo, que estão sempre limitadas no tempo e no espaço e confere às variáveis inteiras/discretas (por exemplo, o volume do arejador) um significado físico mais próximo do real.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Costa L., Oliveira P. (2001). Evolutionary Algorithms Approach to the Solution of Mixed Integer Non-Linear Programming Problems. *Computers & Chemical Engineering* 25, Elsevier, 257-266.
- Deb, K., Agrawal, R.B. (1995). Simulated binary crossover for continuous search space. *Complex Systems* 9(2) 115-149.

Deb K. (2000) An efficient constraint handling method for genetic algorithms, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 186(2-4) 311-338.

Ekama G. A., Barnard J. L., Günthert F. W., Krebs P., McCorquodale J. A., Parker D. S., Wahlberg E. J. (1978). Secondary Settling Tanks: Theory, Modeling, Design and Operation. Technical Report 6, IAWQ – International Association on Water Quality.

Espírito Santo I.A.C.P., Fernandes E.M.G.P., Araújo M.M., Ferreira E.C. (2006). On the secondary settler models robustness by simulation. *WSEAS Transactions on Information Science and Applications*, ISSN: 1790-0832, Issue 12, Vol. 3, 2323-2330.

Espírito Santo I.A.C.P. (2007). *Desenho ótimo de estações de águas residuais através da modelação de funções custo*. Tese de doutoramento. Escola de Engenharia, Universidade do Minho, Braga.

Fourer, R., Gay, D. M., Kernighan, B. (1990). A modeling language for mathematical programming. *Management Science* 36(5), 519-554.

Goldberg, D. (1989). *Genetic Algorithms in Search. Optimization, and Machine Learning*, Addison-Wesley.

Henze M., Grady Jr C. P. L., Grady Jr C. P. L., Marais G. V. R., Matsuo T. (1986). Activated Sludge Model no. 1, Technical Report 1, IAWPRC Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment.

Takács, I., Patry, G. G., Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research* 25(10), 1263–1271.

Tyteca D., Smeers Y. and Nyns E. J. (1977). Mathematical Modeling and Economic Optimization of Wastewater Treatment Plants, *CRC Critical Reviews in Environmental Control*, 8 (1), 1-89.

Vanderbei, R. J., Shanno, D. F. (1999). An interior-point algorithm for nonconvex nonlinear programming. *Computational Optimization and Applications* 13, 231-252.